(E) ISSN: 3030-3214
Volume 3, № 2
2025

UO‘K: 544.18:661.183.2 10.70769/3030-3214.SRT.3.2.2025.1

TIOKARBAMID, FORMALDEGID, LIMON KISLOTA ASOSIDA OLINGAN KATIONITNING REAKSION QOBILYATINI KVANT-KIMYOVIY HISOBLASH NATIJALARI

Mo‘minova Shaxnoza Normahammadovna
Termiz davlat universiteti katta o‘qituvchisi, Termiz, O‘zbekiston
E-mail: mominovashahnoza24@gmail.com

Muqumova Gulvar Jumayevna
PhD, dots. Termiz davlat universiteti, Termiz, O‘zbekiston
E-mail: gulvarmuqimova@gmail.com

Turayev Xayit Xudoynazarovich
Kimyo fanlari doktori, prof. Termiz davlat universiteti, Termiz, O‘zbekiston
E-mail: hhturaev@rambler.ru

Kasimov Sherzod Abduzoirovich
Kimyo fanlari doktori, prof. Termiz davlat universiteti, Termiz, O‘zbekiston
E-mail: qosimovsh@tersu.uz

Annotatsiya. *Hozirgi kunda issiqlik va atom elektrostansiyalari, kimyoviy ishlab chiqarish, radiotexnika va elektrotexnika sanoatida, mashinasozlik, IES, AES, oziq-ovqat va farmasevtika sanoatida jadal rivojlanmoqda. Shunday ekan, kationitlarga bo‘lgan talab homon ortmoqda. Dunyo miqyosida tanlab ta’sir etuvchan, teskor va ekspress kompleks hosil qiluvchi kationitlar olishda tarkibida azot hamda oltingugurt bo‘lgan kationitlarni organik polimer va mineral matritsalarga immobillashga yo‘naltirilgan ilmiy-tadqiqot ishlari yo‘lga qo‘yilgan. Ushbu ishda oqova suvlarni zararli va og‘ir metallardan tozalash uchun samarali kationit sintezi hamda Tiokarbamid, formalin va vino kislotasi asosidagi kationit molekulasining reaksion qobilyatini kvant-kimyoviy hisoblash dasturlari Avogadro, Hyper Chem 8.01, Asselrys MS Modeling 3.0.1 cheklangan Semi-empirical (UHF) usuli orqali, SCF-MO qo‘llagan holda yarim empirik AM1, MNDO, PM3, RM1 va MINDO3 metodi bilan Intel Pro Pentium 1.40 GGs kompyuterida hisoblashlar olib borildi. Natijalar shuni ko‘rsatadiki tiokarbamid, formalin hamda limon kislotasi ishtirokida sintez qilingan kationitning sorbsiya sig‘imi yuqori hamda asosan Cu^{2+}, Ni^{2+}, Zn^{2+} ionlari uchun samarali ekanligini ko‘rish mumkin.*

Kalit so‘zlar: *Kationit, sorbsiya sig‘imi, tiokarbamid, formalin, limon kislotasi, kvatn-kimyoviy hisoblash.*

РЕЗУЛЬТАТЫ КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИХ РАСЧЕТОВ РЕАКЦИОННОЙ СПОСОБНОСТИ КАТИОНИТА, ПОЛУЧЕННОГО НА ОСНОВЕ ТИОКАРБАМИДА, ФОРМАЛЬДЕГИДА, ЛИМОННОЙ КИСЛОТЫ

Муминова Шахноза Нормахаммадовна
Термезский государственный университет, Термез, Узбекистан

Мукумова Гульвар Джумаевна
PhD, доц. Термезский государственный университет, Термез, Узбекистан

Тураев Хаит Худойназарович
Доктор химических наук, профессор. Термезский государственный университет, Термез, Узбекистан

Касимов Шерзод Абдузоирович
Доктор химических наук, профессор. Термезский государственный университет, Термез, Узбекистан

Аннотация. *В настоящее время он активно развивается на тепловых и атомных электростанциях, в химическом производстве, в радиотехнической и электротехнической промышленности, машиностроении, в IES, АЭС, пищевой и фармацевтической промышленности. Поэтому спрос на катиониты постоянно растет. При получении катионитов*

которые избирательно воздействуют на окружающую среду, производят комплекс tescor и экспресс, были проведены исследовательские работы, направленные на иммобилизацию катионитов, содержащих азот и серу, в органические полимерные и минеральные матрицы. В этой работе рассматривается эффективный синтез катионита для очистки сточных вод от вредных и тяжелых металлов и квантово-химические расчеты реакционной способности молекулы катионита на основе тиокарбамида, формалина и винной кислоты с помощью Avogadro, Hyper Chem 8.01, Asselrys MS Modeling 3.0.1 ограниченным полуэмпирическим методом (UHF), полуэмпирического AM1. были проведены расчеты с использованием методов SCF-MO, MNDO, PM3, RM1 и MINDO3 на компьютере Intel Pro Pentium 1.40 GGs. Полученные результаты свидетельствуют о том, что катионит, синтезированный в присутствии тиокарбамида, формалина и лимонной кислоты, обладает высокой сорбционной способностью и эффективен в первую очередь для ионов Cu^{2+}, Ni^{2+}, Zn^{2+}.
Ключевые слова: *катионит, сорбционная емкость, тиокарбамид, формалин, лимонная кислота, количественно-химический расчет.*

THE RESULTS OF QUANTUM CHEMICAL CALCULATIONS OF THE REACTIVITY OF CATIONITE OBTAINED ON THE BASIS OF THIOCARBAMIDE, FORMALDEHYDE, CITRIC ACID

Muminova Shakhnoza Normakhammadovna
Senior Lecturer at Termez State University, Termez, Uzbekistan

Mukumova Gulvar Dzhumaevna
PhD, Assoc. Prof. Termez State University, Termez, Uzbekistan

Turaev Khait Khudoinazarovich
Doctor of Chemistry, Professor, Termez State University, Termez, Uzbekistan

Kasimov Sherzod Abduzoyirovich
Doctor of Chemistry, Professor, Termez State University, Termez, Uzbekistan

Abstract. *Currently, it is rapidly developing in the heat and nuclear power plants, chemical production, radio engineering and electrical engineering industries , mechanical engineering, IES, AES, food and pharmaceutical industries. Therefore, the demand for cationites is growing homon. In obtaining cationites that selectively affect the world, produce a tescor and an express complex, research work has been carried out aimed at immobilizing cationites containing nitrogen and sulfur into organic polymer and mineral matrices. In this work, effective cationite synthesis to purify effluents from harmful and heavy metals and quantum-chemical computational applications of reactivity of a Thiocarbamide, formalin, and vino acid-based cationite molecule via Avogadro, Hyper Chem 8.01, Asselrys MS Modeling 3.0.1 limited Semi-empirical (UHF) method, semi-empirical AM1 using SCF-MO, MNDO, PM3, RM1, and MINDO3 method with Intel Pro Pentium 1.40 GGs computer calculations were made. The results suggest that cationite synthesized in the presence of thiocarbamide, formalin , and citric acid has a high sorption capacity and can be seen to be effective primarily for Cu^{2+}, Ni^{2+}, Zn^{2+} ions.*
Keywords: *Cationite, sorption capacity, thiocarbamide, formalin, citric acid, quatn-chemical calculation.*

Kirish. Mualliflar tomonidan keltirilgan ushbu ishda turli funksional guruhlarga ega, shu jumladan aminofosfoniklarga ega boʻlgan kuchsiz kislotali kation almashtirgichlarda namunaviy eritmalardan indiy, temir (III) va rux ionlarining sorbsiya kinetikasi oʻrganilgan. Sorbsiya jarayonining aralash diffuziya rejimi oʻrnatilgan, bu koʻrinadigan faollashuv energiyasining qiymatlari bilan tasdiqlangan. Tashqi va ichki diffuziyaning diffuziya koeffitsientlari va tezlik konstantalari hisoblab chiqilgan. Kimyoviy oʻzaro ta'sir bosqichining hissasini aniqlash uchun psevdo-birinchi va psevdo-ikkinchi tartibli modellar qoʻllanilgan [1-5].

Mualliflar tomonidan keltirilgan ushbu ishda 5% karbamid eritmasi bilan ishlov berilgan qaragʻay poʻstlog'ining ogʻir metallar Cu(II), Ni(II), Zn(II) va Pb(II) bilan bogʻliq sorbsion xossalari oʻrganilgan. Tozalangan qobigʻi yuqori sorbsion

(E) ISSN: 3030-3214
Volume 3, № 2
2025

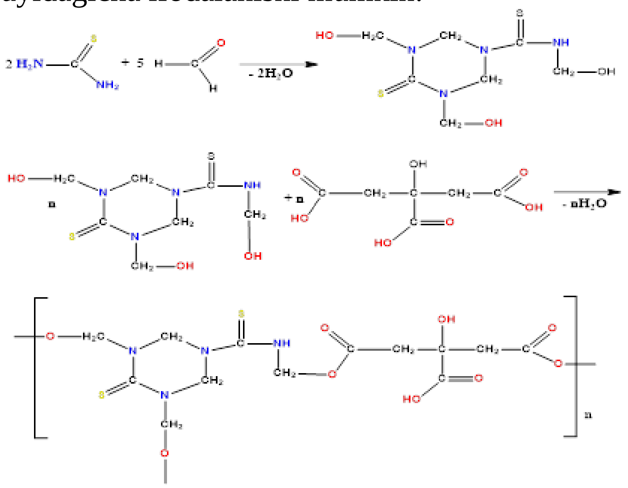
xususiyatlarga ega va ishlov berilmagan po‘st-log‘iga nisbatan bir necha barobar ko‘proq metal-larni saqlashi aniqlangan. Langmuir va Freundlix sorbsiya izotermalarining parametrlari olingan. Po‘stloq va karbamid o‘rtasidagi o‘zaro ta'sirning mumkin bo‘lgan mexanizmlari va karbamid erit-masi bilan ishlangan po‘stlog'ida metallarning adsorbsiyasining kuchayishi sabablari ko‘rib chiqilgan [6].

Ushbu maqolada yangi turdagi kationit - modifikatsiyalangan zeolitlarda og'ir metallar ion-larini sorbsiyalash jarayonining fizik-kimyoviy tahlilidan olingan ma'lumotlar keltirilgan. Og'ir metallar ionlari adsorbsiyasidan so‘ng Xolinskoe konidan olingan modifikatsiyalangan zeolitning IQ spektrlari o‘rganilgan. O‘rganilayotgan namuna-larning energiya-dispersiv spektrlari olingan, bu kationitning ushbu turida og‘ir metallar ionlarining sorbsiyasi faktini tasdiqlashi aniqlangan. O‘zgar-tirilgan organosilikon birikmalari bilan metallni adsorbsiyalash mexanizmlari aniqlangan. Kationit regeneratsiyasidan keyin uning yuzasida rux va nikel ionlarining yo‘qligi isbotlagan [7].

Adabiyotlar tahlili va usullari. Rangli va nodir metallarni ajratib olish uchun melamin, formalin va dikarbon kislotalar tarkibida azot va kislorod saqlagan xelat hosil qiluvchi kationitlar sintez qilindi. Sintez qilingan kationitning maqbul sharoitlari o‘rganib chiqildi va kationitlar tarkibi-dagi moddalarning tuzilishi va fizik-kimyoviy xossalari o‘rganildi. Polikondensatlanish reaksiya-larining muqobil harorati sifatida 120°C tanlab olinib, 2,5-3 soat davomida bir tekis reaksiya olib borildi, natijada NaOH ning 0,1 n eritmasida almashinish reaksiya sig‘imi eng yaxshi natija 4,0 mg-ekv/g ni tashkil qildi. melamin, formalin va dikarbon kislotalardan 1:3:1,5 nisbatlarda olinib sintez qilingan kationitlar eng yaxshi ko‘rsatgichga ega bo‘ldi. Raman spektroskopiya va kvant-kim-yoviy xususiyatlari o‘rganildi. Sintez qilingan katio-nitning monomer a’zosining elektron tuzilishi AM-1, PM3, MNDO va RM1 kvant-kimyoviy yarim empirik usul yordamida o‘rganildi. Ligadlarning strukturasi va ularning Cu (II), Zn (II), Ni (II) ionlari bilan koordinatsion birikma hosil qilganligi tad-qiqotlar natijalariga ko‘ra aniqlanadinatijalariga ko‘ra kationitlar tuzilishi taklif qilindi.

Tajribaviy qism: Ushbu kationitni sintez qilishda qaytar sovutgich va avtomatik aralashtir-gich bilan jihozlangan uch og‘izli kolbaga 1,52 g(0,02 mol) tiokarbamid 4 ml(0,05 mol) formalin eritmasida eritib olindi so‘ngra ammoniy gidroksid eritmasidan tomizib H=8-9 ga yetkazildi. 70-80 ℃ haroratda cho‘ziluvchan massa hosil bo‘lganda jarayon to‘xtatildi. Hosil bo‘lgan smolasimon aralashmaga 5 ml ammoniy gidroksiddagi eritma-sida 1,92 g(0,01mol) 2-gidroksi-1,2,3-propantrikar-bon kislotani eritib aralashtirib olindi. Tempratura 110-140°C ga yetganda qattiq massa hosil bo‘lga-nini kuzatildi. So‘ngra massa chinni kosachaga olindi. Sintez qilingan mahsulot quritish shkafida 20 soat mobaynida 100°C da quritib olindi. Mahsulot maydalanib, tarkibidagi qo‘shimchalardan tozalash uchun dastlab NaOH ning 5% li eritmasi bilan keyin, neytral holga kelguncha distilllan suv yordamida qayta qayta yuvib olindi. Jarayon so‘ngida mayda g‘ovaklardan iborat bo‘lgan oq rangli mahsulot hosil bo‘ldi. Reaksiya unumi 92 %.

Amalga oshirilgan tadqiqotlar natijalariga ko‘ra, olingan TKFV kationitning sintez reaksiyasi quyidagicha ifodalanishi mumkin:



1-rasm. TKFV kationitining sintez reaksiyasi: tiokarbamid, formaldegid va limon kislotaning bosqichli polikondensatsiyasi.

Natijalar tahlili. Tiokarbamid, formalin va limon kislotasi asosidagi kationit molekulasining reaksion qobilyatini kvant-kimyoviy hisoblash dasturlari Avogadro, Hyper Chem 8.01, Asselrys MS Modeling 3.0.1 cheklangan Semi-empirical (UHF) usuli orqali, SCF-MO qo‘llagan holda yarim empirik AM1, MNDO, PM3, RM1va MINDO3 metodi bilan Intel Pro Pentium 1.40 GGs kom-pyuterida hisoblashlar olib borildi. Molekula geometriyasini optimallashtirish Polak-Ribiere

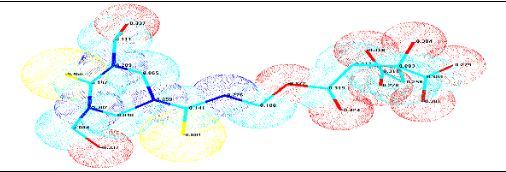
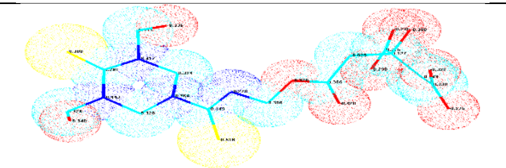
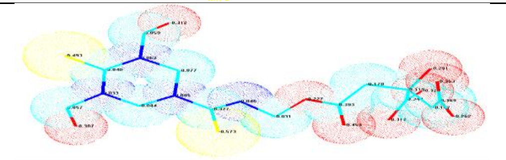
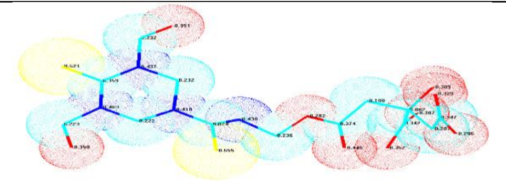
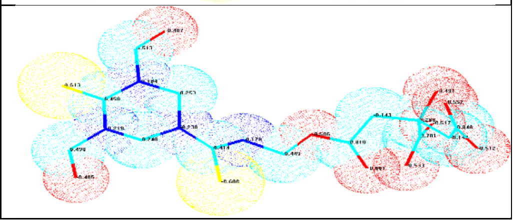
(E) ISSN: 3030-3214
Volume 3, № 2
2025

(Conjugate gradient) algoritmini qo'llagan holda amalga oshirildi. Ushbu metodlar molekulaning umumiy energiyasini va molekulyar orbitallarning elektron zichliklarini, hamda o'rganilayotgan molekulaning geometrik optimizatsiyasini amalga oshirish imkonini yaratdi.

Muhim hisoblanadigan elektron xarakteristikalardan biri bu Malliken bo'yicha atomlardagi effektiv zaryadlar (CHARGES) va sistemaning to'liq energiyasidir (TOTAL ENERGY) (3.15-jadval).

1-jadval

Kationit molekulalari donor atomlaridagi effektiv zaryad taqsimoti

Hisoblash usuli	**TKFL**
AM1	
MNDO	
PM3	
RM1	
MINDO3	

Kvant-kimyoviy beshta yarim empirik metodlar natijalariga ko'ra xulosa qilib shuni aytish mumkinki, tiokarbamid, formalin va vino kislotasi asosidagi kationit molekulasida manfiy effektiv zaryadining yuqori qiymatlari C=O, C=S,C-O-C, triazin xalqadagi azot va ikkilamchi amin N-H guruhlaridagi kislorod, oltingugurt va azot atomlarida ekanligi ushbu atomlarning metall bilan koordinatsion bog' bilan bog'lanib 2 ta to'rt, 2 ta besh va 4 ta olti a'zoli xelat turdagi komplekslarni hosil qilishi mumkinligidan dalolat beradi.

2-jadval

Kationit molekulalaridagi donor atomlarning effektiv zaryadi qiymatlari

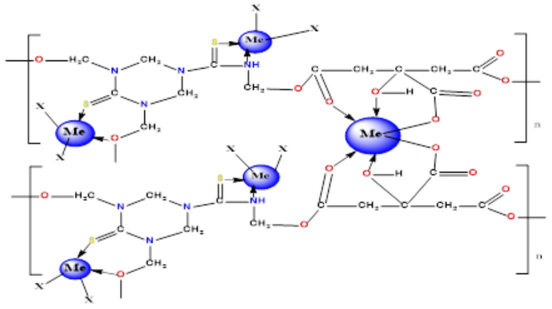
Atomlar	**AM1, eV**	**MNDO, eV**	**PM3, eV**	**RM1, eV**	**MINDO3, eV**
TKFL					
$\delta_q O^{1}_{(C-O)}$	-0,337	-0,336	-0,312	-0,351	-0,487
$\delta_q N^{1}_{(N)}$	-0,289	-0,417	-0,063	-0,437	-0,184
$\delta_q S^{1}_{(C=S)}$	-0,456	-0,388	-0,493	-0,521	-0,613
$\delta_q O^{1}_{(O-H)}$	-0,337	-0,340	-0,307	-0,350	-0,485
$\delta_q N^{2}_{(N)}$	-0,302	-0,443	-0,033	-0,463	-0,218
$\delta_q N^{3}_{(N)}$	-0,259	-0,364	-0,005	-0,410	-0,238
$\delta_q S^{2}_{(C=S)}$	-0,601	-0,516	-0,573	-0,655	-0,680
$\delta_q N^{1}_{(NH)}$	-0,276	-0,270	-0,046	-0,430	-0,170
$\delta_q O^{1}_{(C-O-C)}$	-0,272	-0,320	-0,227	-0,282	-0,506
$\delta_q O^{1}_{(C=O)}$	-0,424	-0,420	-0,453	-0,445	-0,661
$\delta_q O^{2}_{(O-H)}$	-0,304	-0,308	-0,291	-0,309	-0,491
$\delta_q O^{3}_{(O-H)}$	-0,301	-0,290	-0,329	-0,352	-0,533
$\delta_q O^{2}_{(C=O)}$	-0,279	-0,285	-0,312	-0,307	-0,517
$\delta_q O^{3}_{(C=O)}$	-0,319	-0,322	-0,353	-0,329	-0,552
$\delta_q O^{2}_{(C-O)}$	-0,278	-0,276	-0,262	-0,296	-0,512
E	-4732,9594 (kcal/mol)	-4726,7814 (kcal/mol)	-4755,0919 (kcal/mol)	-3366,8973 (kcal/mol)	-4803,1988 (kcal/mol)

Muhokama. Tiokarbamid, formalin, 2-gidroksi-1,2,3-propantrikarbon kislota asosidagi kationitning HOMO dagi elektron zichligi triazin xalqadagi azot guruhlaridagi kislorod va azot atomlarida hamda C=O, C=S, C-O-C atomlarida joylashgan (3.26-rasm). Shu sababdan ham tiokarbamid, formalin, 2-gidroksi-1,2,3-propantrikarbon kislota asosidagi kationit kuchli maydon hosil qiladi va Pirsonning "qattiq va yumshoq kislotalar va asoslar" prinsipiga ko'ra, -O-, -C=O, C=S guruhi va triazin halqasidagi azot atomlari spektator kationit

(E) ISSN: 3030-3214
Volume 3, № 2
2025

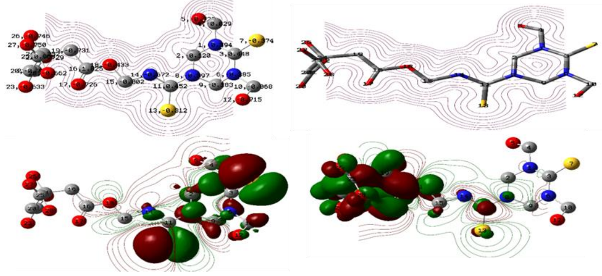
sifatida raqobatlashadi. Natijada oraliq kislotalar Cu(II), Ni(II), Zn(II)bilan triazin halqasidagi azot atomlari hamda -O-, C=S, va -C=O guruhi 2 ta to‘rt, 2 ta besh va 4 ta olti a’zoli mustahkam xelat xalqali komplekslar hosil qiladi. Ushbu kompleks birikmalar metall ioni orbitallida bo‘linish energiyasi yuqori bo‘lganligi sababli past spinli kompleks birikmalar hisoblanadi.

Olib borilgan tadqiqotlar natijasiga ko‘ra IQ- va kvant-kimyoviy tadqiqotlar natijalariga ko‘ra, Cu(II), Zn(II) va Ni(II) ning TKFL kationitning bitta monomeriga nisbatan hosil qilgan kompleks birkmasining tuzilishi quyidagicha ifodalanishi mumkin:



2-rasm. TKFL kationit asosida Cu(II), Zn(II) va Ni(II) ionlari bilan hosil bo‘lgan koordinatsion komplekslarning taklif etilgan molekulyar modeli (IQ-analiz va kvant-kimyoviy hisob-kitoblar asosida).

Xulosa. Ushbu tadqiqotlar natijasiga ko‘ra o‘rganilayotgan kationitlarning Olib borilgan tadqiqotlar natijasiga ko‘ra o‘rganilayotgan kationitlarning geometriyalari Avogadro dasturidan foydalanib hosil qilingan va GaussView 6.0.16 dasturiy ta’minotidan foydalanib Molekula tuzilishlari optimizatsiyalari gaz fazasidagi izolyatsiyalangan molekulalar uchun Li - Yanga- Parra korrelyatsiya funksionalli (B3LYP) va 6- 311 G (d, p) bazislari bilan DFT metodida olib borildi.



3-rasm. TKFL da zaryadning atomlarda taqsimlanishi va chegaraviy orbitallarning lokallashuvi.

FOYDALANILGAN ADABIYOTLAR RO‘YXATI

1. Усольцев А. В. и др. Кинетика сорбции ионов индия, железа и цинка слабокислотными катионитами //Сорбционные и хроматографические процессы. – 2015. – Т. 15. – №. 5. – С. 720-729.
2. Сыч Н. В. и др. Сорбция ионов тяжелых металлов активными углями, полученными химическим активированием кизиловой косточки //Хімія, фізика та технологія поверхні. – 2011. – Т. 2. – №. 2. – С. 213-218.
3. Войлошников Г. И., Войлошникова Н. С., Бывальцев А. В. Сорбция цианидных комплексов металлов активными углями //Цветные металлы. – 2010. – №. 7. – С. 29-32.
4. Сушинская Н. В., Курченко В. П. Сорбция тяжёлых металлов меланиновыми пигментам ряда дереворазрушающих грибов //Теоретическая и прикладная экология. – 2019. – №. 4. – С. 83-87.
5. Алексеева А. А., Шайхиев И. Г., Степанова С. В. Очистка вод от ионов тяжелых металлов биосорбционными материалами на основе опада лиственных деревьев //Известия Уфимского научного центра РАН. – 2015. – №. 3. – С. 19-30.
6. Хохотва А. П. Адсорбция тяжелых металлов сорбентом на основе сосновой коры //Химия и технология воды. – 2010. – Т. 32. – №. 6. – С. 604-612.